УДК 519.24

В. І. Попадинець (Інститут проблем математичних машин і систем НАН України)

АЛГОРИТМІЧНІ ОСНОВИ ПЛАНУВАННЯ ТА ОЦІНКИ РЕЗУЛЬТАТІВ БАГАТОФАКТОРНОГО ЕКСПЕРИМЕНТУ

The offered algorithm is a generalized formalized description of the construction of matrices mnohofaktornyh yeksperymentiv planning and evaluation of the results for an fixed number of factors from 2 to 255. The algorithm provides the experimenter the opportunity to choose a priori reasonable number of experiments to construct a linear model response function based on which the evaluation results. The algorithm is focused on creating autonomous software POM for operational decisions of various tasks of planning and evaluation of practical optimization problems, especially for complex processes and is appropriate for use when the implementation of real experiments that investigated are very costly.

Запропонований алгоритм є узагальненим формалізованим описом побудови матриць планування багатофакторних єкспериментів та оцінки їх результатів для фіксованого числа факторів в межах від 2 до 255. Алгоритм забезпечуе експериментатору можливість апріорі вибирати доцільну кількість експериментів для побудови лінійної моделі функції відгуку на базі якої здійснюється оцінка результатів. Алгоритм зорієнтований на створення автономного програмного забезпечення ПОМ для оперативного рішення різноманітних задач планування та оцінки результатів оптимізаційних практичних задач, насамперед, для складних технологічних процесів і є доцільним для використання коли реалізація реальних експериментів, що досліджуються є вельми затратною.

Як відомо з теорії багатофакторних експериментів [1,2], експеримент, в якому реалізуються усі можливі комбінації рівнів факторів, називається повним факторним експериментом (ПФЕ). Коли число рівнів кожного фактора рівне двом, то число необхідних дослідів для реалізації усіх можливих комбінацій рівнів факторів є $N = 2^n$, де N – число дослідів, n – число факторів, 2 – число рівнів. Як правило, ПФЕ є доцільним тільки тоді коли натуральна реалізація кожного з експериментів для процесу, що досліджується не є вельми затратною.

Початковим етапом планування експерименту є побудова матриці планування. При цьому, виходячи з того, що експериментатор має мати можливість апріорі вибирати доцільну кількість експериментів для побудови лінійної моделі на базі якої буде здійснюватись оцінка результатів багатофакторного експерименту, матриця планування експерименту формується у вигляді:

$$Z = [z_{ij}] = \begin{bmatrix} z_{11} & z_{21} & \dots & z_{L1} \\ z_{12} & z_{22} & \dots & z_{L2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ z_{1M} & z_{2M} & \dots & z_{LM} \end{bmatrix}, \tag{1}$$

де i – номер фактора, j – номер експеримента;

$$M = 2^{n-p}, \tag{2}$$

M – кількість експериментів, причому

$$L = \begin{cases} n - p, & \text{при} \quad n < 255 \\ n - p_{\max},, & \text{при} \quad n \geq 255 \end{cases}, \quad 0 \leq p \leq p_{\max}, \tag{3}$$

$$p_{\max} = \max\Big\{p : 2^{n-p} \geq n+1,\ p = 0, 1, \dots\Big\}$$

Елементи матриці Z визначаються за формулами:
при $k=1$:

$$z_{1j} = (-1)^j, \quad j = 1, 2; \tag{4}$$

при $k = \overline{2, L}$:

$$\begin{gathered} z_{ij+2^{k-1}} = z_{ij}, \quad i = \overline{1, k-1}, \quad j = \overline{1, 2^{k-1}}, \\ z_{kj} = \begin{cases} +1, & \text{при} \quad j = \overline{1, 2^{k-1}} \\ -1, & \text{при} \quad j = \overline{2^{k-1}+1, 2^k}. \end{cases} \end{gathered} \tag{5}$$

Зазначимо, що z_{ij} – кодове значення i-го фактора в j-му експерименті, причому

$$z_{ij} = \frac{x_{ij} - x_i^0}{\delta_i}, \tag{6}$$

де x_{ij} – натуральне значення i-го фактора в j-му експерименті,

$$x_i^0 = \frac{x_{i\min} + x_{i\max}}{2}, \tag{7}$$

$$\delta_i = \frac{x_{i\max} - x_{i\min}}{2}, \tag{8}$$

$x_{i\min}$, $x_{i\max}$ – натуральні граничні значення зміни i-го фактора, причому $x_{i\max} - x_{i\min} > 2\varepsilon_0^*$,

δ_i – інтервал варіювання i-го фактора,

$\varepsilon_0^* = \min\left\{2^{-k+1} : \ 2^{-k} = 0, \ k = 1, 2, \ldots\right\}$ – машинний нуль.

Тут і далі вважається, що фактори є незалежними змінними і їх значення детерміновні, а кожен з результатів експерименту – випадкова величина з нормальним законом розподілу. Виходячи з цього оцінка результатів експерименту здійснюється на основі функції відгуку вигляду:

$$y = b_0 + \sum_{i=1}^{\overline{L}} b_i z_i, \quad -1 \le z_i \le 1. \tag{9}$$

Відповідно до теорії планування експерименту $[1, 2]$ коефіцієнти b_i $(i = 0, 1, \ldots, n)$ визначаються за формулами:

$$b_0 = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^{M} y_j, \tag{10}$$

$$b_i = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^{M} y_j z_{ij}, \tag{11}$$

причому

$$M = 2^L, \tag{12}$$

$y_j = y\Big(x_{1j}, x_{2j}, \ldots, x_{Lj}\Big)$ – значення параметра оптимізації y в j-му експерименті,

$$\big\{z_i,\ i=\overline{m_{r-1}+1, m_r}\big\} = \left\{\prod_{k=1}^{r} z_{i_k}, i_k = \overline{k, L+k-r},\ i_k < i_{k+1}\right\}, r=\overline{2, L-1},\ L\geq 3, \quad (13)$$

$$z_{\overline{L}} = \prod_{i=1}^{L} z_i, \qquad (14)$$

$$m_1 = L, \qquad (15)$$

$$m_{j+1} = L + \sum_{i=1}^{j} \frac{L!}{(i+1)!(L-i-1)!}, j = \overline{1, L-2} \text{ при } L \geq 3, \qquad (16)$$

$$\bar{L} = 1 + \sum_{i=1}^{L-1} \frac{L!}{i!(L-i)!}, \qquad (17)$$

$$\begin{gathered} \left\{z_{ij},\ i = \overline{m_{r-1}, m_r}\right\} = \left\{\prod_{k=1}^{r} z_{i_k j}, \quad i_k = \overline{k, L+k-r},\ i_k < i_{k+`1}\right\}, \\ r = \overline{2, L-1}, \quad j = \overline{1, M} \quad \text{при } L \geq 3, \end{gathered} \qquad (18)$$

$$z_{\bar{L}j} = \prod_{i=1}^{L} z_{ij}, \quad j = \overline{1, M}, \qquad (19)$$

$$\begin{gathered} x_{ij} = x_i^0 + \delta_i z_{ij}, \quad x_i^0 = \Big(x_{i\min} + x_{i\max}\Big)/2, \quad \delta_i = (x_{i\max} - x_{i\min})/2, \\ i = \overline{1, L},\ j = \overline{1, M}. \end{gathered} \qquad (20)$$

Отже, елементи матриці планування експерименту (1) визначаються по формулам (2)–(5), а побудова функції відгуку виду (9) здійснюється на основі формул (6)–(8), (10)—(20).

Примітка

Приклад для програмної реалізації співвідношень (13) і (18) при $L \geq 3$.

$$\big\{z_i,\ i = \overline{m_1+1, m_2}\big\} = \big\{z_k z_l,\ k = \overline{1, L-1},\ l = \overline{2, L},\ k < l\big\},\ L \geq 3,$$

$$\begin{gathered} \big\{z_i,\ i = \overline{m_2+1, m_3}\big\} = \big\{z_k z_l z_m,\ k = \overline{1, L-2},\ l = \overline{2, L-1},\ m = \overline{3, L}, \\ k < l < m\big\},\ L \geq 4, \end{gathered}$$

$$\begin{gathered} \big\{z_{ij},\ i = \overline{m_1+1, m_2},\ j = \overline{1, M}\big\} = \big\{z_{kj} z_{lj},\ k = \overline{1, L-1},\ l = \overline{2, L},\ k < l, \\ j = \overline{1, M}\big\},\ L \geq 3, \end{gathered}$$

$$\begin{gathered} \big\{z_{ij},\ i = \overline{m_2+1, m_3},\ j = \overline{1, M}\big\} = \big\{z_{kj} z_{lj} z_{mj},\ k = \overline{1, L-2},\ l = \overline{2, L-1}, \\ m = \overline{3, L},\ k < l < m,\ j = \overline{1, M}\big\},\ L \geq 4. \end{gathered}$$

Вхідні дані: $\Big\{n,\ X,\ \varepsilon,\ Y\Big\}$, де

$$X = \begin{bmatrix} x_{1\min}, & x_{2\min}, & \ldots, & x_{L\min} \\ x_{1\max}, & x_{2\max}, & \ldots, & x_{L\max} \end{bmatrix}^T,$$

$\varepsilon = [\varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots, \varepsilon_L]^T$, ε_i – абсолютна похибка визначення оптимального значення i-го фактора ($\varepsilon_i > \varepsilon_0^*$),

$$Y = [y_1, y_2, \ldots, y_M]^T.$$

Таблиця 1.

Вибір числа факторів

Число факторів $2 \le n < \infty$	Гранична кількість експериментів	
	$M_{\min} = 2^{n-p_{\max}}$	$M_{\max} = 2^n$

Таблиця 2.

Вибір числа експериментів

Параметр p: $0 \le p \le p_{\max}$	Число експериментів $M = 2^{n-p}$	$M = 2^{n-p}$

Вихідні дані: $\left\{y^*,\ x^*,\ y^{**},\ x^{**},\ b,\ Z,\ \bar{Z},\ \bar{X}\right\}$, де

$$y^* = \max\left\{y\left(z_1^*, z_2^*, \ldots, z_{\overline{L}}^*\right) = y\left(z_{11_j}, z_{22_j}, \ldots, z_{LL_j}\right)\right\},$$

$$y^{**} = \min\left\{y\left(z_1^{**}, z_2^{**}, \ldots, z_{\overline{L}}^{**}\right) = y\left(z_{11_j}, z_{22_j}, \ldots, z_{LL_j}\right)\right\},$$

$$z_{ii_j} = -1 + i_j \cdot h_i,$$

$$h_i = \max\left\{2\ /\ (N_i + 1)\,,\quad \varepsilon_0^*,\quad i = \overline{1, L}\right\},$$

$$N_i = \mathrm{int}\left[\left(x_{i\max} - x_{i\min}\right)\ /\ \varepsilon_i\right],\quad i = \overline{1, L},\quad i_j = \overline{0, N_i + 1},$$

$$x^* = \left(x_1^*, x_2^*, \ldots, x_L^*\right)^T,$$

$$x^{**} = \left(x_1^{**}, x_2^{**}, \ldots, x_L^{**}\right)^T,$$

$$x_i^* = x_i^0 + \delta_i z_i^*,\quad i = \overline{1, L},$$

$$x_i^{**} = x_i^0 + \delta_i z_i^{**},\quad i = \overline{1, L},$$

$$b = \left(b_0, b_1, \ldots, b_{\overline{L}}\right)^T,$$

$$\bar{Z} = [z_{ij}] = \begin{bmatrix} z_{11} & z_{21} & \ldots & z_{L1} & z_{L+11} & \ldots & z_{\overline{L}1} \\ z_{12} & z_{22} & \ldots & z_{L2} & z_{L+12} & \ldots & z_{\overline{L}2} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ z_{1M} & z_{2M} & \ldots & z_{LM} & z_{L+1M} & \ldots & z_{\overline{L}M} \end{bmatrix},$$

$$\bar{X} = [x_{ij}] = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{21} & \ldots & x_{L1} \\ x_{12} & x_{22} & \ldots & x_{L2} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ x_{1M} & x_{2M} & \ldots & x_{LM} \end{bmatrix},\qquad \begin{matrix} x_{ij} = x_i^0 + \delta_i \cdot z_{ij}, \\ i = \overline{1, L},\quad j = \overline{1, M}. \end{matrix}$$

При програмній реалізації даного алгоритму є необхідним врахування наступного.

1. Основні властивості елементів матриці $\overline{Z}$ [1,2]:

1.1. $\sum\limits_{j=1}^{M} z_{ij}=0, \quad i=\overline{1,L},$

1.2. $\sum\limits_{j=1}^{M} z_{ij}^2=M, \quad i=\overline{1,L},$

1.3. $\sum\limits_{j=1}^{M} z_{ij}z_{kj}=0, \quad i\neq k, \quad i,k=\overline{1,L}.$

1.4. Точки в матриці планування вибираються так, щоб похибка прогнозного значення любого значення y, яке визначається функцією відгуку (2) була однакова на рівних відстанях від центра експерименту $x^0=(x_1^0,\dots,x_n^0)^T$ і не залежала від напрямку.

2. Помилки паралельних (повторних) експериментів. Для виключення з числа експериментальних даних грубих помилок (так званий брак при повторних експериментах) використовується критерій Стюдента [1]. Значення y_{j_q} $(1\le j\le M,\ 1\le q\le \widetilde{N}_j,\ 3\le \widetilde{N}_j)$ вважається бракованим, якщо $\dfrac{y_{j_q}-\overline{\overline{y}}_j}{\overline{\overline{s}}_j}\ge t$, де

$$\overline{\overline{y}}_j=\frac{\sum\limits_{\substack{k=1\\k\neq q}}^{\widetilde{N}_j} y_{j_k}}{\widetilde{N}_j-1}, \qquad \overline{\overline{s}}_j=\sqrt{\frac{\sum\limits_{\substack{k=1\\k\neq q}}^{\widetilde{N}_j}\left(y_{j_k}-\overline{\overline{y}}_j\right)^2}{\widetilde{N}_j-2}},$$

а значення t береться із таблиці t-розподілу при числі степенем свободи $f=\widetilde{N}_j–2$.

3. Однорідність дисперсій

3.1. Якщо число дисперсій, які порівнюються більше двох і одна з них значно більша інших та у всіх точках здійснено однакове число повторних експериментів $\widetilde{N}$, то для перевірки однорідності дисперсій можна використати критерій Кохнера [1]:

$$G=\frac{s_{\max}^2}{\sum\limits_{j=1}^{N} s_j^2},$$

де $s_{\max}^2=\max\left\{s_j^2, \quad j=\overline{1,M}\right\}$, $\quad s_j^2=\dfrac{\sum\limits_{q=1}^{\widetilde{N}_j}\left(y_{j_q}-\overline{y}_j\right)^2}{\widetilde{N}_j-1}$, $\quad \overline{y}_j=\dfrac{\sum\limits_{q=1}^{\widetilde{N}_j} y_{j_q}}{\widetilde{N}_j}$, $1\le j\le M$, $\widetilde{N}_j$ – число повторення j-го експеримента $(2\le \widetilde{N}_j)$.

Гіпотеза про однорідність дисперсій підтверджується, якщо значення G не перевищує табличне значення.

3.2. Результати вимірювань y_{j_k}, $k=\overline{1,\widetilde{N}_j}$ вважаються однорідними якщо для любого y_{j_k} відносне відхилення $r_k = \left| \dfrac{y_{j_k} - \overline{y}_j}{s_j \sqrt{\dfrac{\widetilde{N}_j - 1}{\widetilde{N}_j}}} \right| > r$.

Тут $\overline{y}_j = \dfrac{\sum\limits_{k=1}^{\widetilde{N}_j} y_{j_k}}{\widetilde{N}_j}$, $s_j = \sqrt{\dfrac{\sum\limits_{k=1}^{\widetilde{N}_j} \left(y_{j_k} - \overline{y}_j \right)^2}{\widetilde{N}_j - 1}}$, r – табличне значення при $f = \widetilde{N}_j - 2$ [2].

4. Дисперсія відтворення. Якщо число повторних експериментів однакове ($\widetilde{N}_j = \widetilde{N}$) для всієї матриці Z, то дисперсія параметра оптимізації $\{y\}$ (дисперсія відтворення)

$$s_{\{y\}}^2 = \frac{\sum\limits_{j=1}^{N} \sum\limits_{q=1}^{\widetilde{N}} \left(y_{j_q} - \overline{y}_j \right)^2}{M\left(\widetilde{N} - 1\right)}.$$

У протилежному випадку

$$s_{\{y\}}^2 = \frac{\sum\limits_{j=1}^{N} f_j s_j^2}{\sum\limits_{j=1}^{N} f_j}.$$

де s_j^2 – дисперсія j-го експерименту, $f_j = \widetilde{N}_j - 1$.

5. Перевірка адекватності моделі. Для перевірки адекватності моделі за критерієм Фішера необхідно обчислити величину $F = \dfrac{s_{a\partial}^2}{s_{\{y\}}^2}$, де $s_{a\partial}^2 = \dfrac{\sum\limits_{j=1}^{N} \Delta y_j^2}{f}$, $\Delta y_j^2 = \left(y_j - b_0 - \sum\limits_{i=1}^{n} b_i x_{ij} \right)^2$, $f = M - (n - 1)$. Якщо значення F не перевищує табличного, то з відповідною довірчою ймовірністю модель можна вважати адекватною [1].

6. Перевірка значимості коефіцієнтів. Дисперсія коефіцієнтів b_i визначається за формулою

$$s_{\{b_i\}} = \frac{s_{\{y\}}}{\sqrt{M}}.$$

При цьому довірчі інтервали $\Delta b_i = \pm t s_{\{b_i\}}$, де t – табличне значення критерія Стюдента при числі степеней свободи з яким визначалось $s_{\{b_i\}}^2$ та вибраному рівні значимості (як правило 0,05) [1]. Коефіцієнт вважається значимим в разі $|b_i| > \dfrac{t s_{\{y\}}}{\sqrt{M}}$.

1. *Налимов В.В.* Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий. – М.: Наука, 1976. – 279с.
2. *Адлер Ю.П. и др.* Применение математической статистики при анализе вещества. – М.: Гос. изд. физ.-мат. лит., 1960. – 430 с.

Одержано 05.11.2013